

Ogłoszenie o konkursie na stanowisko doktoranta/doktorantki

Projekt: **True Bioisosteres – Structural and Thermodynamic Classification of Molecular Fragments for Ligand Design**

Jednostka: **Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski**

Miejsce realizacji: Warszawa, Polska

Kierownik projektu: dr hab. Maura Malińska

Finansowanie: SONATA BIS

Grupa naukowa dr hab. Maury Malińskiej, prof. ucz., działająca na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, poszukuje doktoranta/doktorantki do realizacji projektu SONATA BIS pt. „True Bioisosteres – Structural and Thermodynamic Classification of Molecular Fragments for Ligand Design”.

Projekt dotyczy eksperymentalnego i obliczeniowego opisu bioizosterów, czyli cząsteczek lub fragmentów cząsteczek wykazujących podobieństwo w kontekście oddziaływania z tym samym miejscem wiążącym. W naszym podejściu grupa cząsteczek lub fragmentów może być uznana za bioizosteryczną wtedy, gdy wykazuje komplementarność względem tego samego miejsca wiążącego w trzech kluczowych aspektach: dopasowania sterycznego, dopasowania elektrostatycznego oraz efektu hydrofobowego.

Wiązanie cząsteczki z receptorem nie jest prostym, w pełni przewidywalnym procesem: rozpoznanie molekularne zmienia zarówno strukturę, jak i dynamikę obu partnerów, a także organizację cząsteczek rozpuszczalnika. Dlatego zrozumienie roli kształtu cząsteczki, słabych oddziaływań niekowalencyjnych oraz wody w tworzeniu kompleksu jest kluczowe dla projektowania rzeczywistych, zróżnicowanych bioizosterów.

Grupa prowadzi badania łączące krystalografię, termodynamikę wiązania oraz metody obliczeniowe w celu ilościowego opisu podobieństw molekularnych i zamian bioizosterycznych. Projekt daje możliwość pracy na styku chemii supramolekularnej, chemii medycznej, chemii obliczeniowej i krystalografii.

Zakres obowiązków

Do zadań doktoranta/doktorantki będzie należało:

- prowadzenie badań w ramach projektu, w tym krystalizacja, pomiary dyfrakcji rentgenowskiej monokryształów, pomiary ITC dla układów gospodarz–gość, symulacje dynamiki molekularnej oraz obliczenia DFT;
- aktywny udział w całym procesie badawczym i publikacyjnym — od tworzenia koncepcji badań po przygotowanie manuskryptów;
- współpraca i skuteczna komunikacja z członkami zespołu oraz z zewnętrznymi grupami badawczymi;
- udział w planowaniu strategii badawczych i rozwijaniu nowych kierunków projektu.

Wymagania

Kandydat/kandydatka powinien/powinna posiadać:

- tytuł magistra chemii, fizyki lub pokrewnej dyscypliny, albo być na końcowym etapie przygotowania pracy magisterskiej;
- samodzielność, aktywność i inicjatywę w pracy naukowej;

- dobrą znajomość języka angielskiego;
- bardzo dobrą organizację pracy, rzetelność, dokładność oraz umiejętność pracy zespołowej.

Mile widziane

- doświadczenie w programowaniu lub gotowość do rozwijania kompetencji programistycznych;
- zainteresowanie krystalografią, chemią supramolekularną, termodynamiką wiązania lub metodami obliczeniowymi.

Kandydat/kandydatka musi spełniać wymagania określone w art. 113 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. — Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, Dz.U. z 2018 r., poz. 1668 z późn. zm.

Oferujemy

- pełnoetatowe stypendium doktoranckie na okres 48 miesięcy w wysokości 5000 PLN netto miesięcznie w przypadku rekrutacji w standardowym terminie do Szkoły Doktorskiej w czerwcu; w przypadku rekrutacji poza standardowym trybem wysokość stypendium może być istotnie niższa i wynosić 5000 PLN brutto;
- możliwość współautorstwa publikacji w uznanych czasopismach naukowych;
- wsparcie w rozwijaniu umiejętności eksperymentalnych, obliczeniowych i analitycznych;
- udział w konferencjach krajowych i międzynarodowych;
- pracę w interdyscyplinarnym projekcie łączącym eksperyment i metody obliczeniowe.

Wymagane dokumenty

Zainteresowane osoby proszone są o przesłanie:

- CV; w przypadku współautorstwa publikacji prosimy o krótki opis wkładu kandydata/kandydatki w ich powstanie;
- listu motywacyjnego;
- informacji o przetwarzaniu danych osobowych — wzór dostępny na stronie: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/> ;
- referencji lub danych kontaktowych do osób mogących udzielić referencji.

Dokumenty należy przesłać do dnia **26 czerwca 2026** na adres: **mmalinska@chem.uw.edu.pl**, wpisując w tytule wiadomości: PhD position.

Wyniki konkursu zostaną ogłoszone na stronie crystal.chem.uw.edu.pl nie później niż 14 dni po rozstrzygnięciu konkursu.